今回この非線形スピン緩和を取り扱うのに、確率過程の基本公式と経路積分による方法を用いて、確率分布、平均、揺らぎなどを求めたが、 $< S_z >_{eq}$ なども含めて、理論値と非常に良く一致した。

またこの方法はスピンのまわりの環境が量子系の場合にも適用でき、有限温度の効果をも論ずることが可能であるので、これについても検討する。

3. 確率微分方程式の数値解法

黒 田 朱 美

自然現象には、確率過程を用いて考察できる現象が多くあり、しばしば、フォッカー・プランク方程式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left\{\sigma^2(x)P(x,t)\right\} - \frac{\partial}{\partial x}\left\{b(x)P(x,t)\right\} \qquad (1)$$

で記述される。この方程式を解けば、さまざまな情報を得ることができる。しかし、フォッカー・プランク方程式を解くことは、拡散項が非線形であったり、境界が特異点であるときには困難である。

一方、伊藤型の確率微分方程式

$$dX(t) = b(X(t))\,dt + \sigma(X(t))\,dB(t) \qquad (2)$$

は、フォッカー・プランク方程式(1)と同等であり、この式を用いて数値計算をすることは、比較的簡単にできると思われる。そこで本修士論文では、(1)式のままでは解くことの困難な確率分布を求めるために、伊藤型の確率微分方程式を利用して、数値的に解く方法を確立し、さらに計算法の妥当性を吟味した。

確率微分方程式を用いて数値計算を遂行するには、(2)を差分化したとき、右辺の第2項目にあらわれる$(B_{t_{k+1}}-B_{t_k})$が、平均が0、分散が$(t_{k+1}-t_k)$に等しい$Gauss$分布に従うことに注目すればよい。$(B_{t_{k+1}}-B_{t_k})$に$Gauss$乱数を代入して差分方程式を計算する。計算回数を多くとれば、時刻tでの確率分布を得ることができる。

ところで、上述の計算法は、常微分方程式の数値解法の1つである$Euler$公式とよく

似ている。常微分方程式の数値計算法には、*Euler*公式よりもさらに精度の良い*Runge–Kutta*公式があるが、我我の場合にも、さらに精度を良くするために*Runge–Kutta*型の計算法の導入を試みた。*Runge–Kutta*公式では微分係数が問題になるのであるが、一般の微分、積分に対応するのは、伊藤型の確率微分方程式ではなく、ストラトノビッチ型の確率微分方程式であることを考慮し、伊藤型の確率微分方程式をストラトノビッチ型の確率微分方程式に変換したあとで微分形に直すことにより、*Runge–Kutta*型の計算法を導入した。

以上のようにすれば、常微分方程式の解法に応じて、確率微分方程式に対しても*Euler*型公式、*Runge–Kutta*型公式を拡張できる。しかし、これらの計算法の精度はどの程度で、何に依存しているのかははっきりしていない。常微分方程式の数値計算法では、計算の精度は刻み幅に依存する。しかし確率微分方程式の場合、１回の数値計算を行うごとに乱数(この場合*Gauss*乱数)を使用し、さらに求めたい数値解を得るまでに同様の計算を多数回繰り返さなければならないので、計算精度は刻み幅だけでなく、計算回数にも依存する。そこで、刻み幅や計算回数、使用する*Gauss*乱数を変えて数値計算を行い、これらの計算法の精度がどの程度であるのかを調べた。計算精度は計算回数、および、使用する*Gauss*乱数にかなり依存することがわかった。特に、*Runge–Kutta*型公式の場合は、計算回数が多いほど誤差が小さくなる傾向が見られるが、計算回数がある程度以上に多くなれば、刻み幅には依存しなくなる。したがって、乱数は数値計算の中で重要な位置を占めている。さらに、実際に数値計算で使用した乱数が理想的であるかどうかを調べるために、*Gauss*乱数の生成に必要な一様乱数について検定を行った。一様乱数の検定法にはいろいろな種類があるが、今回は、乱数発生のアルゴリズムの一つである乗算合同法の性質を調べるためにスペクトル検定法を用いた。

次に、今までの数値計算法は、通常*noise*は*white*であるとして行われているが、相関が時間がたつにつれて指数関数的に減少する*colored noise*の場合に計算法を拡張した。確率微分方程式を連立させることにより容易に拡張可能である。

このように、数値的に解くことの困難であるフォッカー・プランク方程式を、等価な伊藤型の確率微分方程式を用いて数値的に解く方法を確立した。我我の計算法は、比較的単純であるが、かなり正確に確率分布を求めることができる。本論文では使用した例題は１次元のものであるが、多次元への拡張も比較的容易であろう。